

用L^AT_EX绘制有机化学分子式

赵国平

2011年

1 主要目的

有机化学的分子式比较烦人，绘制起来比较复杂。论文中要用，答辩的时候也要用，代码如何重复使用？谢谢法国朋友Christophe CASSEAU提供的chemfig工具包，解决了大问题。不懂法语，只好把这些关键的例子拿出来，方便借鉴！

毫无疑问，导言部分必须添加`\usepackage{chemfig}`

2 给那些没有耐心者的简介

总有一些人，只是为了应用，却不一定要知道其细节，看过本节就可以应付有机化学的基本需求了。

2.1 基本命令

本包最基本的命令之一：

```
\chemfig{<atome1><type de liaison>[<angle>,<coeff>,  
<n1>,<n2>,<code tikz>]<atome2>}
```

其中，

1. type de liaison: 连接类型
2. angle 元素间的夹角
3. coeff 默认的连线长度系数
4. n1, n2 连线的两个点名称
5. code tikz 颜色或形状的额外选项

2.2 连接的类型

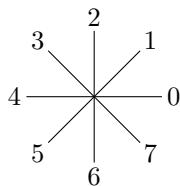
Table 1: 元素间的基本连接形式预定义

序号	表达式	结果
1	<code>\chemfig{A-B}</code>	A — B
2	<code>\chemfig{A=B}</code>	A = B
3	<code>\chemfig{A~B}</code>	A ≡ B
4	<code>\chemfig{A>B}</code>	A ► B
5	<code>\chemfig{A<B}</code>	A ◄ B
6	<code>\chemfig{A>:B}</code>	A B
7	<code>\chemfig{A<:B}</code>	A : B
8	<code>\chemfig{A> B}</code>	A ▷ B
9	<code>\chemfig{A< B}</code>	A ◁ B

2.3 不同类型的公式

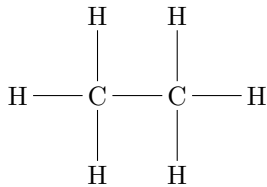
为方便不同方向的输入，宏包给出了角度的简化预定义：

`\chemfig{(-[1]1)(-[2]2)(-[3]3)(-[4]4)(-[5]5)(-[6]6)(-[7]7)-0}`



由此，乙烷的分子式就可以很简单的用下式表示出来：

`\chemfig{C(-[2]H)(-[4]H)(-[6]H)-C(-[2]H)(-[6]H)-H}`



当然，方括号中的数字可用角度表示，一种是相对角度：`[:angle]`；还有一种绝对角度：`[::angle]`

连接线长度系数问题，看例子：

`\chemfig{H_3C-{{(CH_2)}_3}-CH=CH_2}`

得到: $\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}=\text{CH}_2$

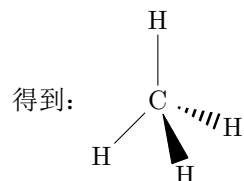
实际上, 我们希望连接线长度相等, 所以, 必须使用系数。

`\chemfig{H_3C-[1.5]{(CH_2)_3}-[1.5]CH=CH_2}`

得到: $\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}=\text{CH}_2$

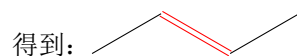
表示方位的实例:

`\chemfig{C(-[5]H)(-[2]H)(<[: -70]H)(<[: -20]H)}`



公式的拓扑形态:

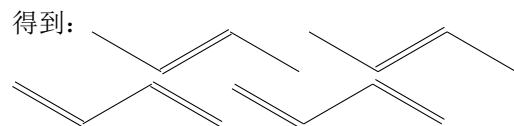
`\chemfig{-[:30]=[: -30,,,red]-[:30]}`



比较效果:

`\chemfig{-[: -30]=[:30]-[: -30]} \chemfig{-[: -30]=^[:30]-[: -30]}\par`

`\chemfig{=[: -30]-[:30]=[: -30]} \chemfig{=_[: -30]-[:30]=^[: -30]}`

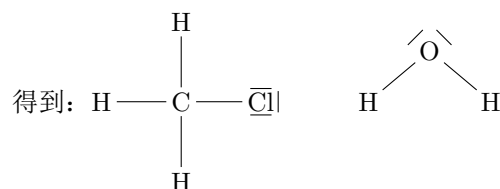


Lewis公式定义:

`\lewis{<indice of position><state of electron>,<atom>}`

`\chemfig{C(-[2]H)(-[4]H)(-[6]H)-\lewis{260,Cl}}\hspace{1cm}`

`\chemfig{[:40]H-\lewis{13,0}-[: -80]H}`



注: 位置是整数值从0到7:

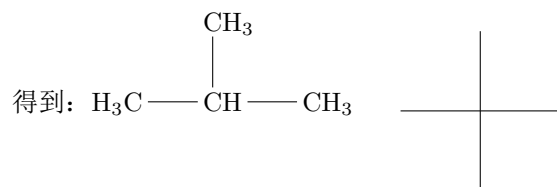
```
\lewis{0.2.4.6.,C}\hspace{1cm}
\lewis{0|2.46.,C}\hspace{1cm}
\lewis{1357,Ar}
```

得到: $\cdot\dot{\text{C}}\cdot$ $|\dot{\text{C}}|$ $\langle\text{Ar}\rangle$

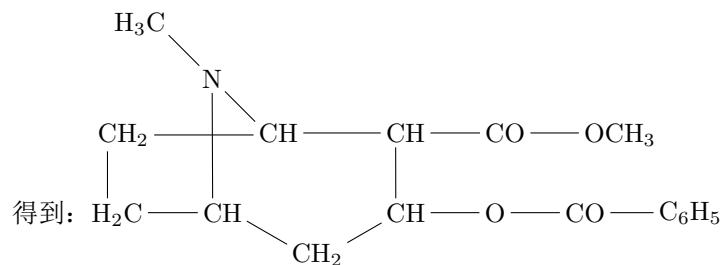
2.4 支化分子

复杂的支化分子

```
\chemfig{H_3C-CH(-[2]CH_3)-CH_3}
\hspace{.5cm}\chemfig{-(-[2])(-[6])-}
```



```
\chemfig{H_2C(-C?[a]H-[:30]CH_2-[:30]C?[b]H-O-CO-C_6H_5)
-[2]CH_2-[1.7]CH(-[3]N?[a]-[3]H_3C)-(-[1.35]C?[b]H-CO-OCH_3)}
```

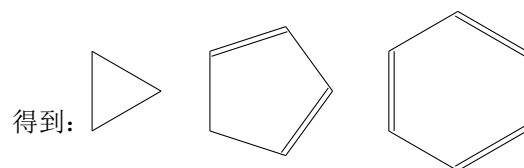


2.5 园

—ChemFig使正多边形的绘制变得非常简单

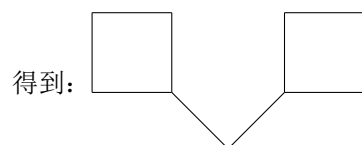
```
\chemfig{*n(<code of molecule>)}

\chemfig{*3(---)}\hspace{.5cm}
\chemfig{*5(==--)}\hspace{.5cm}
\chemfig{*6(==--==)}
```



多边形组合:

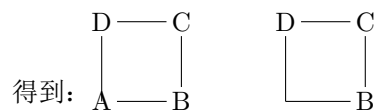
```
\chemfig{*4(-(--[1]*4(----))---)}
```



对比一个不完整的多边形

```
\chemfig{*4(A-B-C-D-)}\hspace{1cm}
```

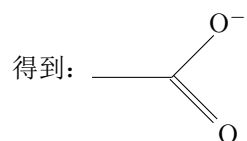
```
\chemfig{*4(-B-C-D-A)}
```



2.6 离子

可以简单的直接写入数学公式。

```
\chemfig{-(-[1]O^{-})=[7]O}
```



正负离子也可以轻松表达:

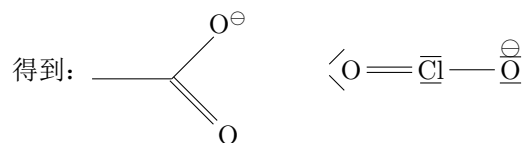
```
\chemfig{-(-[1]O^{\ominus})=[7]O}
```

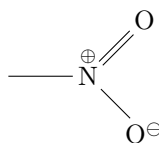
```
\hspace{1cm}
```

```
\chemfig{\lewis{35,0}=\lewis{26,Cl}-\chemabove  
{\lewis{026,0}}{\ominus}}
```

```
\vskip5pt
```

```
\chemfig{-\chemabove{N}{\scriptstyle\oplus}([1]O)-[7]O^{\ominus}}
```





借助上下标指令也可以：

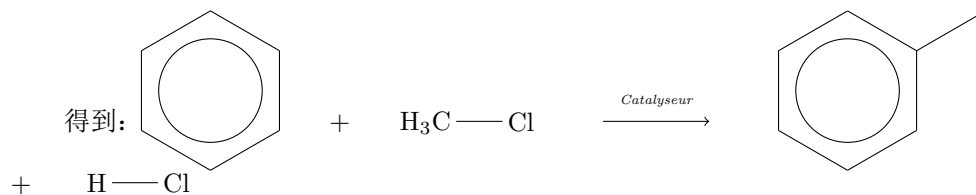
```
\chemfig{\lewis{35,0}=C-\chemabove
[3pt]{\lewis{246,0}}{\hspace{.5cm}\ominus}}
```

得到： $\text{O}=\text{C}-\text{O}^{\ominus}$

2.7 化学方程式

这里是一个化学反应的例子。

```
\chemfig{**6(-----)} \hspace{.5cm} + \hspace{.5cm} \chemfig{H_3C-Cl}
\hspace{.5cm} \chemrel[\itshape\tiny Catalyseur]{->} \hspace{.5cm}
\chemfig{**6(---(-)---)} \hspace{.5cm} + \hspace{.5cm} \chemfig{H-Cl}
```



再来一个例子：

```
\setchemrel{0pt}{1.2em}{6em}
\chemfig{**6(-----)}\chemsign[0.5cm]+\chemfig{H_3C-Cl}
\chemrel[\itshape\tiny Catalyseur]{->}
\chemfig{**6(---(-)---)}\chemsign[0.5cm]+\chemfig{H-Cl}
```

